

# Numerische Entfaltung von Meßwertfunktionen zur zeitdynamischen Signalanalyse

Keßler, Franz Rudolf

Veröffentlicht in:  
Abhandlungen der Braunschweigischen  
Wissenschaftlichen Gesellschaft Band 41, 1989,  
S.211-221



Verlag Erich Goltze KG, Göttingen

## **Numerische Entfaltung von Meßwertfunktionen zur zeitdynamischen Signalanalyse**

von **Franz Rudolf Keßler**, Braunschweig

(Eingegangen am 20.10.1989)

### **Kurzfassung**

Die zeitdynamische Meßwertfunktion bei einem Experiment stellt die „Faltung“ der an sich gesuchten Zeitfunktionen der Signalgröße mit der Deltaimpuls-Responsefunktion des Meßgerätes dar. Es wird ein numerisches Verfahren der exakten „Entfaltung“ angegeben, das die üblichen approximativen Rekursionsverfahren ersetzt. Es arbeitet schnell und kann mit Kleincomputern leicht realisiert werden.

Sodann wird gezeigt, wie mit der „Kommuation“ der Entfaltung die Deltaimpuls-Responsefunktion eines konkreten Gerätes experimentell bestimmt werden kann. Dazu genügt die Applikation einer beliebigen Test-Signalfunktion, typischerweise eines Rechteckimpulses endlicher, aber im Prinzip beliebiger Länge.

In einer ergänzenden Diskussion wird auf den Einfluß des statistisch überlagerten Rauschens der Meßwerte auf die Entfaltungsergebnisse eingegangen. Die Resultate bei der zusätzlichen Anwendung von Glättungsoperationen werden angegeben.

### **Abstract**

In dynamic experiments the measured values depending on time are different from the wanted signal function because we have always a convolution of the signal function with the delta-puls response function of the measuring instrument. An algorithm is given to solve the problem of deconvolution in an exact manner. This numerical algorithm substitute the approximative deconvolution methodes given elsewhere. The given algorithm is simple with respect to the numerical procedure and works very quickly. Moreover it can be realized on personal computers.

Based on the commutation property the given method of deconvolution is also used to determine the needed delta-puls response function of a concrete experimental apparatus by means of an arbitrary test puls applicated in place of the sample. The test puls normally is a rectangular puls of in principle arbitrary duration.

In a separate chapter the problem of deconvolution of measured functions containing noise is discussed. The result of additively smoothing operations is shown.

### **I. Einleitung**

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit dem generellen Problem der numerischen „Entfaltung“ von Funktionen, wie sie typischerweise bei zeitdynamischen Experimenten, z. B. bei der „Dynamischen Differenz-Kalorimetrie“ (DDK), auftreten.

Wenn man die Gültigkeit des Superpositionsprinzips, d.h. „Linearität“ bei der Gesamtreaktion des Meßgerätes voraussetzen kann, und dies ist im allgemeinen der Fall, wenn der gegebene Dynamikbereich der Meßanordnung nicht überschritten wird, so stellt die Zeitfunktion des „Ausschlagens“ („Meßwertfunktion“) die „Faltung“ der Zeitfunktion der eigentlichen Signalgröße mit der Deltaimpuls-Responsefunktion des Meßgerätes dar.

Bei der DDK, um beim Beispiel zu bleiben, ist die Signalgröße die freigesetzte Wärmeleistung in der Probe als Funktion der Zeit und/oder der Temperatur. Die Signalgröße tritt dabei sowohl bei der „isothermen“ als auch bei der „anisothermen“ DDK als zeitdynamische Signalfunktion auf. Aufgrund der relativ großen thermischen Trägheit des Gesamtmeßsystems ist die Deltaimpuls-Responsefunktion von relativ großer „Nachwirkungsdauer“, so daß die Meßwertfunktion gegenüber der Signalfunktion eine im allgemeinen erhebliche „Verfremdung“ erfährt.

Das generelle meßtechnische Problem besteht bekanntlich darin, die gesuchte „wahre“ Signalzeitfunktion aus der Meßwertfunktion auf allgemeine und möglichst „einfache“ Weise zu rekonstruieren.

Die vorliegenden Ausführungen beziehen sich auf ein Computer-gestütztes Verfahren der „Entfaltung“, das im Gegensatz zu an anderer Stelle vorgeschlagenen approximativen Rekursionsverfahren exakt und in einem einmaligen „Durchgang“ durch die diskretisiert aufgenommenen Meßwerte die Signalfunktion liefert. Bei höherer Genauigkeit ist es damit um mindestens eine Größenordnung schneller.

Entfaltung zur Gewinnung der Signalfunktion setzt immer die Kenntnis der konkret vorliegenden Deltaimpuls-Responsefunktion (DIR) des Meßgerätes voraus. Nur in seltenen, weil „einfachen“ Fällen kann diese Responsefunktion hinreichend genau aus einem theoretischen Modell, bzw. „Ersatzschaltbild“ der Meßanordnung, z.B. durch analytische oder numerische Lösung der entsprechenden Differentialgleichung, ermittelt werden. Die experimentelle(!) Bestimmung der Deltaimpuls-Responsefunktion stößt andererseits immer dann auf prinzipielle Schwierigkeiten, wenn relativ zur Relaxationszeit des Meßgerätes (vgl. dazu weiter unten) hinreichend kurze und zugleich ausreichend große Pulse anstelle der Signalgröße nicht appliziert werden können.

Es wird diesbezüglich eine Lösung angegeben, die sich auf die Applikation einer im Prinzip beliebigen Testsignalfunktion anstelle der Probe stützt.

Durch Anwendung der Entfaltungsoperation wird dabei auf der Grundlage der jetzt bekannten Signalfunktion die konkret vorliegende Deltaimpuls-Responsefunktion der gegebenen Meßanordnung experimentell bestimmt.

In einem weiteren Abschnitt wird eine Diskussion über den Einfluß von Rauschen bzw. Meßwertschwankungen auf das Entfaltungsergebnis geführt. Da die Entfaltung als mathematische Prozedur einer Differentiationsoperation vergleichbar ist, verbunden mit einer besonders kritischen Fehlerfortpflanzung, ist der „Rauschempfindlichkeit“ des Entfaltungsverfahrens besondere Aufmerksamkeit zu schenken. Anhand vergleichender Modellrechnungen werden dazu quantitative Aussagen gemacht.

Die vorliegenden Ausführungen beziehen sich zwar primär auf die Meßtechnik der differentiellen Thermoanalyse (vgl. z. B. [1]), sie sind jedoch von allgemeiner Art und

lassen sich auf analoge Fälle übertragen, in denen eine Signalfunktion durch den Response des Meßgerätes zu einer modifizierten Ausgangsfunktion „gefaltet“ wird.

## II. Die Faltung zur Meßwertgröße und ihre diskretisierte Darstellung

Unter der Voraussetzung der „Linearität“ des Meßsystems ist die Zeitfunktion des Ausschlages  $A(t)$  („Meßwert“) bei bekannter Zeitfunktion der Signalgröße  $S(t)$  und bekannter Deltaimpuls-Responsefunktion  $R(t)$  gegeben durch das sogen. Duhamel-Integral, d.h. durch das Faltungsintegral (kurz: durch die „Faltung“; vgl. z.B. [2]):

$$A(t_1) = \int_0^{t_1} S(\tau) \cdot R(t_1 - \tau) \cdot d\tau. \quad (1)$$

Es soll bereits hier darauf hingewiesen werden, daß bezüglich der Faltung die Kommutierbarkeit existiert, d.h. es gilt (vgl. z.B. [3]):

$$\int_0^{t_1} S(\tau) \cdot R(t_1 - \tau) \cdot d\tau = \int_0^{t_1} S(t_1 - \tau) \cdot R(\tau) \cdot d\tau. \quad (2)$$

Bei der Übertragung des Faltungsintegrals mit infinitesimaler Schrittweite auf eine durch  $N$  numerierte Abfolge endlich großer Zeit-diskreter, jedoch hinreichend kleiner Schritte geht das Faltungsintegral in eine Reihensumme über:

$$A(N_1) = \Delta t \cdot \sum_{M=1}^{M=N_1} S(M) \cdot R(N-M+1) \quad (3)$$

entsprechend  $t = (N-1) * \Delta t$  bzw.  $t_1 = (N_1-1) * \Delta t$ .

Dabei beginnt der betrachtete Zeitabschnitt bei  $t=0$ , bzw.  $N=1$ , mit dem ersten von Null verschiedenen Signalwert  $S(1)$ . Der Wert  $R(1)$  ist dabei Null oder ungleich Null entsprechend dem Funktionswert der DIR bei  $t=0$ . Entsprechendes gilt für die folgenden  $R(i)$ -Werte.

Zur Erläuterung der Faltungsoperation in der diskretisierten Form ist dazu in Abb. 1 eine graphische Darstellungsform gewählt worden, die beide Funktionen  $S(t)$  und  $R(t)$  so gegenüberstellt, daß die jeweiligen Faktoren untereinanderstehen. Der Wert  $A(t_1)$  ergibt sich nach Multiplikation der untereinanderstehenden Funktionswerte und anschließender Summation von  $M=1$  bis  $M=N_1$ . Diese Summe ist abschließend noch mit dem Zeitintervall  $\Delta t$  zu multiplizieren.

Eine Computer-gestützte Berechnung des Faltungsintegrals erfolgt demnach mit Hilfe weniger Programmzeilen in einer Programmschleife. Die Anzahl und die Größe der Zeitschnitte  $\Delta t$  sind selbstverständlich so zu wählen, daß die Zeitfunktionen vollständig und mit hinreichender zeitlicher Auflösung (siehe weiter unten) erfaßt werden.

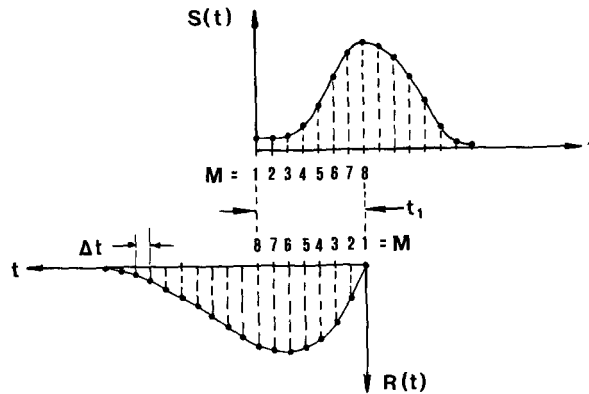


Abb. 1:

Schema zur Erläuterung der mathematischen Operation der „Faltung“ der Funktionen  $S(t)$  und  $R(t)$ .

Abszisse: diskretisierte Zeit  $t = (N-1) * \Delta t$ ; mit  $N=1, 2, 3, \dots$

Die dargestellte Zeitverschiebung  $t_1 = (N_1-1) * \Delta t$  entspricht dem Wert  $N_1=8$  und liefert den Wert  $A(8)$  als Resultat.

– Zur Symbolerläuterung siehe Text. –

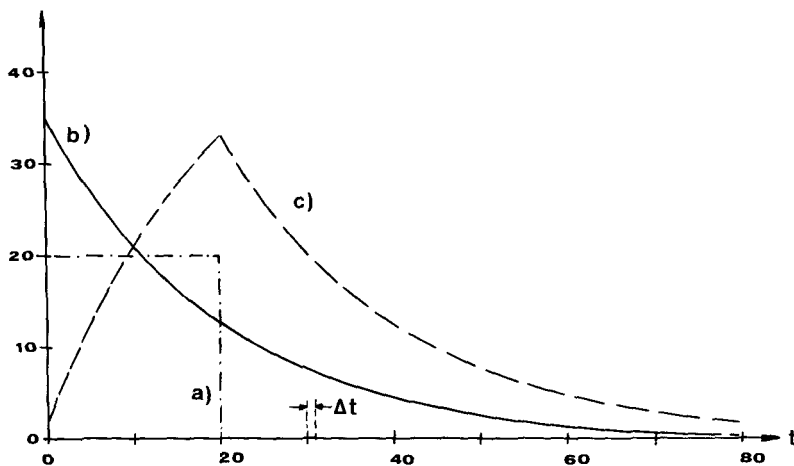


Abb. 2:

Beispiel der Faltung einer Signalfunktion  $S(N)$  mit der Deltaimpuls-Responsefunktion  $R(N)$  zur zeitdynamischen Ausschlagsfunktion („Meßwertfunktion“)  $A(N)$ .

Abszisse: diskretisierte Zeit  $t = (N-1) * \Delta t$ ; mit  $N=1, 2, 3, \dots$

$D$  = Darstellungsfaktor der jeweiligen Ordinate.

a) Rechtecksignalfunktion  $S(N) = 10$  der Breite  $N=1$  bis  $N=21$ ;  $D=2$

b) Exponentialfunktion  $R(N) = 1 * \exp(-N/20)$ ;  $D=35$

c) Ausschlagsfunktion  $A(N)$  als Resultat der Faltung;  $D=0,25$

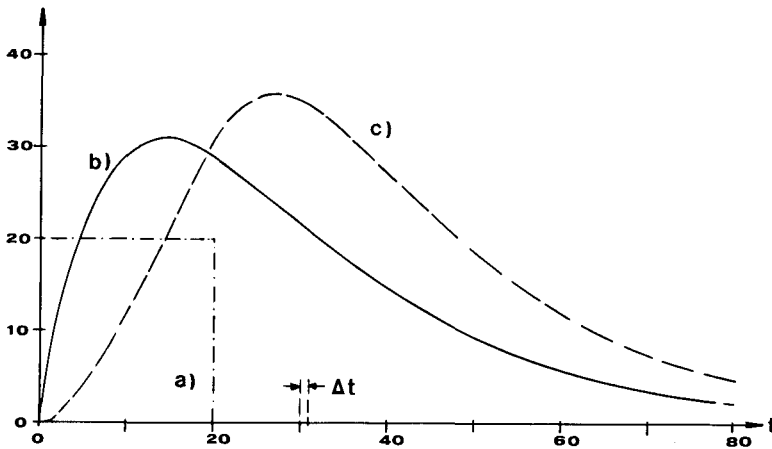


Abb. 3:

Beispiel der Faltung einer Signalfunktion  $S(N)$  mit der Deltaimpuls-Responsefunktion  $R(N)$  zur zeitdynamischen Ausschlagsfunktion („Meßwertfunktion“)  $A(N)$ .

Abszisse: diskretisierte Zeit  $t = (N-1) * \Delta t$ ; mit  $N=1, 2, 3, \dots$

$D$  = Darstellungsfaktor der jeweiligen Ordinate.

- a) Rechtecksignalfunktion  $S(N) = 10$  der Breite  $N=1$  bis  $N=21$ ;  $D=2$
- b) Doppel exponentialfunktion  $R(N) = 5 * [\exp(-N/20) - \exp(-N/10)]$ ;  $D=25$
- c) Ausschlagsfunktion  $A(N)$  als Resultat der Faltung;  $D=0,15$

Abb. 2 und 3 zeigen als Beispiele die so berechneten Funktionen  $A(t)$  im Fall eines rechteckförmigen Signalimpulses bei einem einfach relaxierenden Meßsystem, dessen Deltaimpuls-Responsefunktion eine reine Exponentialfunktion mit der Zeitkonstanten  $\tau_1$  ist, bzw. bei einem DDK-Meßsystem, dessen Deltaimpuls-Responsefunktion eine Doppel exponentialfunktion vom angegebenen Typus mit den beiden unterschiedlichen Zeitkonstanten  $\tau_1$  und  $\tau_2$  ist.

Bekanntlich läßt sich die Ausschlagsfunktion  $A(t)$  auch mittels zweimaliger Anwendung der Fouriertransformation gewinnen: Das Frequenzspektrum der Signalzeitfunktion ist mit dem Frequenzspektrum der Deltaimpuls-Responsefunktion, letzteres wird als „Übertragungsfunktion“ bezeichnet, zu multiplizieren.  $A(t)$  ergibt sich aus der Fourier-Rücktransformation dieses Produktes in den Zeit-Raum (vgl. z.B. [4], [5]).

Entsprechende Computerberechnungen sind jedoch aufwendiger zu programmieren als im Fall der Faltung nach (3) und empfehlen sich allenfalls dann, wenn im Rechner ein entsprechendes Fouriertransformations-Hilfsprogramm in der üblichen „fast-Version“ implementiert ist.

Bei der Anwendung der Fouriertransformation kommt überdies das bekannte Problem der „Verfremdung“ („alienation“) hinzu, wenn nur ein endlicher Zeitabschnitt der Fouriertransformation zugeführt wird (vgl. z.B. [3]).

In beiden Fällen, Faltung und Fouriertransformation, ist naturgemäß das „Abtasttheorem“ zu beachten, d.h., jede inhärente Frequenzkomponente muß mindestens zweimal innerhalb jeder Zeitspanne von der Größe ihrer Periodendauer durch einen Meßwert erfaßt sein. Anderenfalls wird sie entsprechend einer Tiefpaßwirkung aus der Spektralverteilung eliminiert. Bei der numerischen Faltung ist der Zeitschritt  $\Delta t$  entsprechend klein zu wählen.

### III. Isolation der Signalzeitfunktion durch Entfaltung

Ist die Deltaimpuls-Responsefunktion des Meßgerätes  $R(t)$  bekannt, so kann mit Hilfe des Fouriertransformationsverfahrens, aber wiederum einfacher noch mit Hilfe einer „Entfaltung“, die gesuchte Zeitfunktion der Signalgröße  $S(t)$  aus der Ausschlagsfunktion  $A(t)$  gewonnen werden.

Zur Realisierung dieser Entfaltung wird an anderer Stelle [6] ein approximatives Rekursionsverfahren vorgeschlagen. Nach [6] liefern ca. 20 Rekursionsschritte ausreichend gute Ergebnisse.

Im folgenden wird ein exaktes und direktes numerisches Entfaltungsverfahren angegeben.

Die Entfaltung erfolgt durch den folgenden Algorithmus:

$$S(N) = \frac{1}{\Delta t \cdot R(1+Q)} \left[ A(N+Q) - \Delta t \cdot \sum_{M=1}^{(N-1)} S(M) \cdot R(N+1+Q-M) \right]. \quad (4)$$

Die Signalgröße  $S(t)$  bzw.  $S(N)$  wird gewonnen, indem die differentielle Größe  $dt * S(t)$  bzw.  $\Delta t * S(N)$  beim Schritt von  $(t-dt)$  auf  $t$  bzw. von  $(N-1)$  auf  $N$  berechnet wird. Dabei werden bei der Variation von  $M=1$  bis  $M=(N-1)$  stets in aufsteigender Vervollständigung mit wachsendem  $N$  jeweils die exakten Werte  $S(M)$  verwendet.

Zur Bedeutung der Größe  $Q=1,2,3,\dots$  in (4) ist folgendes auszuführen: Zunächst sei  $R(1) \neq 0$ , und dann ist  $Q=0$ . In diesem Fall ergibt sich der Wert  $S(1)$  unmittelbar aus der Gleichheitsrelation für den Zeitnullpunkt, d.h.  $N=1$ , die gemäß (3) lautet:

$$A(1) = S(1) \cdot R(1) \cdot \Delta t. \quad (5)$$

Sollte  $R(1) = 0$  sein, so ist jedoch stets  $A(1) \neq 0$ , da nach Voraussetzung  $S(1) \neq 0$  ist (siehe oben). In diesem Fall ergibt sich, wie aus (3) hervorgeht,  $S(1)$  dann aus der Beziehung:

$$A(2) = \Delta t \cdot S(1) \cdot R(2). \quad (6)$$

Dementsprechend ist in (4)  $Q=1$  zu setzen.

Allgemein gilt deswegen: Sind in der Deltaimpuls-Responsefunktion eine Anzahl  $Q$  der ersten Werte gleich Null, so gilt für den Wert  $S(1)$ :

$$S(1) = A(1+Q) / [\Delta t \cdot R(1+Q)] \quad (7)$$

und in der Gleichung (4) erhält  $Q$  diesen Wert.

Der Wert  $Q$  berücksichtigt also die „Zeitverzögerung“ zwischen  $S(t)$  und  $A(t)$ , d. h. die Zeit bis zum Auftreten des ersten von Null verschiedenen Wertes der Meßwertfunktion nach Signaleinsatz, und erlaubt es, für  $S(t)$  und  $A(t)$  den gleichen Zeitnullpunkt zu wählen.

Die Entfaltung nach Gleichung (4) ist die eindeutige Auflösung der Faltung nach Gleichung (3). Der Beweis erfolgt leicht durch vollständige Induktion bei Variation von  $N$ . Das Resultat ist insofern exakt und erfolgt in einem einzigen Durchgang. Die Programmierung ist analog der der Faltung einfach.

Bei der numerischen Rechnung hängt die Genauigkeit des Entfaltungsergebnisses naturgemäß von der Genauigkeit der Vorgabewerte und der Genauigkeit der digitalen Rechnung ab. Rundungsfehler in den Rechnungen machen sich entsprechend bemerkbar. Da der jeweilige  $S(N)$ -Wert stets aus einer Differenz großer Zahlen und damit „differentiell“ gewonnen wird, empfiehlt sich u. U. die Rechnung mit „doppelter Genauigkeit“.

Ist die Deltaimpuls-Responsefunktion  $R(N)$  eine von zunächst kleinen Werten ansteigende Funktion, z. B. in der Form einer Doppel exponentialfunktion (vgl. oben in Abb. 2), so werden die Fehler in den  $S(N)$ -Werten, die bei kleinen  $N$ -Werten entstehen, mit wachsendem  $N$  mit den größer werdenden Gewichten  $R(N)$  multipliziert, was wiederum zu wachsenden Fehlern in den neuen  $S(N)$ -Werten führt. In diesem Fall existiert also eine relativ ungünstige „Fehlerfortpflanzung“. Dies ist jedoch keine Eigenart der hier vorgestellten Entfaltungsmethode, sondern gilt stets für die Entfaltungsoperation als einem grundsätzlich differentiellen Verfahren. Diesbezüglich sind Rauscheinflüsse analog zu beachten (vgl. weiter unten).

Zur Bestimmung der Fehlereintragung allein durch die numerische Rechengenauigkeit bei der Entfaltungsprozedur wurden Modellrechnungen mit den in Abb. 2 dargestellten Funktionen durchgeführt. Danach ist festzustellen, daß bei der Rechnung mit üblicher Genauigkeit, d. h. hier unter Mitnahme von zwölf signifikanten Ziffern, die Funktionen mit einer auf den Maximalwert der Funktion bezogenen Standardabweichung von ca.  $\frac{1}{1000}$  reproduziert werden.

Mit Rücksicht auf die experimentell gegebene Meßgenauigkeit erscheint diese numerische Genauigkeit im allgemeinen völlig ausreichend. Im Fall der Rekonstruktion einer Rechtecksignalfunktion ist insbesondere darauf hinzuweisen, daß im Entfaltungsergebnis der Einsatz und der Abfall der Signalfunktion in der Form des Rechteckimpulses absolut „scharf“ erscheinen, d. h., daß der Sprung zwischen dem Wert Eins und Null jeweils innerhalb eines (!) Schrittes von  $N$  auf  $(N+1)$  erfolgt.

#### **IV. Experimentelle Bestimmung der Deltaimpuls-Responsefunktion**

Die experimentelle Bestimmung, bzw. Überprüfung der im Einzelfall gültigen Deltaimpuls-Responsefunktion ist im allgemeinen nicht möglich, denn entweder kann kein Nadelimpuls hinreichend kleiner Halbwertsbreite als Signal appliziert werden, und/oder das Meßgerät zeigt bei dieser kurzen Pulsdauer und der dabei stets experimentell beschränkten Pulshöhe keinen hinreichend auswertbaren Ausschlag.



Die Lösung des Problems ist mittels eines im Prinzip beliebig geformten Test-Signals  $S_T(t)$  möglich, der an der Stelle der späteren Signalgröße einzuschleusen ist. Die Deltaimpuls-Responsefunktion  $R(t)$  läßt sich nämlich aus der Entfaltung der aufgenommenen Ausschlagsfunktion  $A(t)$  mit der jetzt bekannten (!) Funktion  $S(t)$  gewinnen. Denn als Folge der Vertauschbarkeit der Funktionen  $R(t)$  und  $S(t)$  bei der Faltung [siehe Gleichung (2)] ist auch die Vertauschbarkeit bei der Entfaltung in Gleichung (4) gegeben, d. h., es gilt bei bekanntem  $S(t)$  und vereinbarungsgemäß  $S(1) \neq 0$ :

$$R(N) = \frac{1}{\Delta t \cdot S_T(1)} \left[ A(N) - \sum_{M=1}^{(N-1)} R(M) \cdot S_T(N+1-M) \right] \quad (8)$$

mit  $R(1) = A(1)/S_T(1)$ ;  $N = 2, 3, 4, \dots, N(\max)$ .

$N(\max)$  entspricht der Zeit  $t(\max)$ , die abgewartet wurde, bis die Meßgröße  $A(t)$  hinreichend vollständig auf Null abgefallen ist.

In der Praxis empfiehlt es sich, wegen der oben diskutierten „Fehlerfortpflanzung“, keine „Testsignalpulse“ in der Form einer „Glockenkurve“, d. h. z. B. keine Gaußförmigen Pulse, bzw. Pulse zu verwenden, bei denen die Anfangswerte klein sind und ein ausgeprägtes Maximum bei  $t \neq 0$  erscheint.

Günstig und im allgemeinen auch relativ leicht zu realisieren sind jedoch Rechteckpulse einer angemessenen Dauer  $t_T$ , die eine entsprechend hinreichende Flankensteilheit besitzen. Bei der DDK z. B. kann ein entsprechender Heizpuls in einem temperaturunabhängigen Ohmschen Widerstand, der unmittelbar in der Nähe des späteren Probenortes eingebracht wird, durch einfaches Ein- und Ausschalten des Heizstromes appliziert werden.

Zu diesem Problem der Testheizpuls erzeugung bei der DDK sei der Hinweis erlaubt, daß eine entsprechende Wärmeapplikation durch Lichteinstrahlung insofern vorteilhafter gegenüber der Verwendung eines elektrischen Heizelementes wäre, als keine zusätzliche Wärmekapazität eingebracht würde. Ferner würden Zuleitungsdrähte vermieden, die eine zusätzliche Wärmeableitung aus dem Probenraum zur Folge haben.

Eine „Glättung“ der erhaltenen DIR wird sich bei zu großen Rauschanteilen empfehlen, um bei der nachfolgenden Verwendung dieser DIR bei der Entfaltung der eigentlichen Ausschlagsfunktionen  $A(t)$  den Einfluß dieses Rauschanteils zu mindern (siehe weiter unten).

In einem weiteren Schritt kann man u. U. mittels einer der üblichen Fit-Routinen die Parameter einer Modell-DIR bestimmen, wenn man sich für eine diesbezügliche Modellanalyse oder ein entsprechendes Ersatzschaltbild interessiert. – Zur späteren Verwendung der DIR zur Entfaltung der Meßwerte ist dies jedoch nicht notwendig.

## V. Entfaltung bei überlagertem Rauschen

Die numerische Empfindlichkeit der Entfaltung in der Form der „Fehlerfortpflanzung“ ist oben bereits diskutiert worden. Eine entsprechende Empfindlichkeit besitzt

die Entfaltung gegenüber einer statistisch überlagerten Störgröße in der Ausschlagsfunktion  $A(t)$ , d.h. gegenüber dem Einfluß des Rauschens.

Entsprechend ungünstig wäre auch ein Rauschanteil in der bei der Entfaltung zur Anwendung kommenden Deltaimpuls-Responsefunktion (DIR).

Die Verwendung einer adäquaten, analytisch definierten Modellfunktion für die DIR setzt andererseits bei der konkreten Anwendung die Kenntnis der relevanten Modellparameter voraus. Diese lassen sich zwar, wie oben angedeutet, unter gewissen Näherungsvoraussetzungen ebenfalls unter Verwendung von Test-Signalimpulsen gewinnen (vgl. dazu z.B. [7]), es bleibt aber die systematische Fehlermöglichkeit bestehen, daß die Modellfunktion die wahre DIR nicht hinreichend gut erfaßt.

Als allgemein brauchbares Verfahren bleibt nur die „Glättung“ der experimentellen Funktion zur Eliminierung des Rauschanteils. Dem entspricht spektral gesehen eine „Tiefpaßfilterung“. Diese läßt sich im Rahmen einer Fouriertransformation im Frequenzraum durchführen. Die Abschätzung der geeigneten cut-off-Frequenz dazu ist im allgemeinen relativ leicht möglich, wenn man das zeitliche Schwankungsverhalten des Rauschens im Vergleich mit der im allgemeinen deutlich weniger raschen Variation der zur Diskussion stehenden Funktion betrachtet. Die zweimalige Anwendung der Fourier-Transformation ist aber auch hier im allgemeinen zu aufwendig.

Einfacher und methodisch besser „passend“ erscheint hier die Glättung der Ausschlagsfunktion  $A(N)$  bzw. der DIR  $R(N)$  mit Hilfe von Spline-Funktionen, wobei die Funktionswerte jedoch nicht durch die Meßwerte gehen. Vielmehr werden neue Stützwerte in einem Variationsverfahren zur Minimierung der Fehlerquadratsumme berechnet. Der Abschätzung der dabei tolerierbaren Standardabweichung der neuen Stützwerte von den ursprünglichen Meßwerten kommt dabei eine analoge Bedeutung zu wie die Festlegung der cut-off-Frequenz bei der Tiefpaßfilterung. Ein geeigneter Algorithmus zu diesem „smoothing-Verfahren“ ist dem Repertoire der numerischen Mathematik zu entnehmen (z.B. [8]).

Zur Klärung des Rauscheinflusses wurde der in Abb. 3c) dargestellten, durch Faltung berechneten, also exakten „Meßwertfunktion“ mit Hilfe eines Zufallsgenerators ein Rauschen in der auf das Maximum der Funktion bezogenen relativen Stärke von  $1/1000$  additiv überlagert. Die Entfaltung mit der exakten Rechteckimpulsfunktion [vgl. Abb. 3a)] liefert die Deltaimpuls-Responsefunktion genau entsprechend Abb. 3b), jedoch mit einem auf das Maximum bezogenen relativen Rauschanteil von ca. 5%. Das primäre Signal-Rausch-Verhältnis im Funktionsmaximum hat sich also durch die Entfaltung von 1000 auf 20 verschlechtert.

Das Signal-Rausch-Verhältnis in der gewonnenen Signalfunktion verbessert sich natürlich, wenn die Meßwertfunktion vor der Entfaltung geglättet wurde.

Die Anwendung einer Glättungsprozedur bei dem Verfahren der experimentellen Bestimmung der DIR (vgl. oben) ist jedoch u. U. kritisch. Das betrifft die Anwendung der Glättung sowohl auf die primäre Meßwertfunktion, als auch auf die gewonnene DIR, oder auf den Fall der kombinierten Glättung. U. U. ergibt sich nämlich, um beim Beispiel zu bleiben, statt des theoretisch richtigen Wertes  $R(0) = 0$  in der DIR ein Wert  $\neq 0$ . Eine derartige „Verschiebung“ in der Entfaltung [vgl. die Bedeutung des Para-

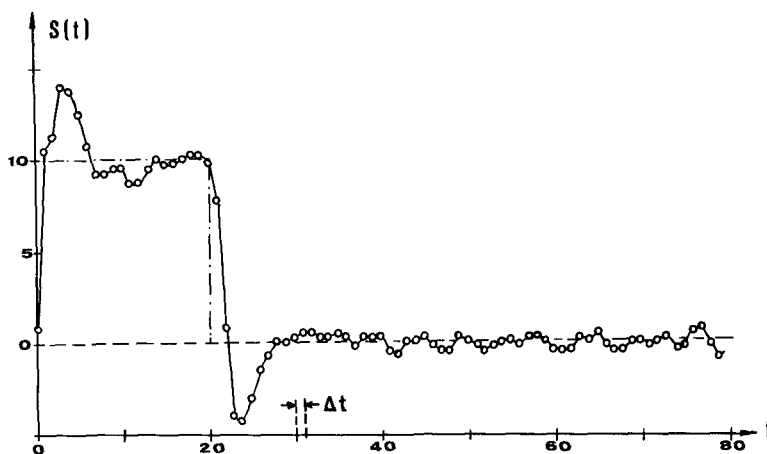


Abb. 4:

Resultat der „Entfaltung“ einer verrauschten Meßwertfunktion entsprechend der Funktion  $A(N)$  in Abb. 3c mittels einer Deltaimpuls-Responsefunktion  $R(N)$  entsprechend der Doppel-Exponentialfunktion in Abb. 3b, die jedoch ihrerseits „empirisch“ mit Hilfe eines „Testpulses“ ermittelt wurde. Als Ergebnis wird die Rechteckimpuls-Signalfunktion gemäß Abb. 3a erwartet. – Zur näheren Diskussion siehe Text.

meters  $Q$  in Gleichung (4)] bedeutet später in der Anwendung dieser DIR die Produktion eines in der Regel völlig unbrauchbaren Entfaltungsergebnisses. Gerade aufgrund der „rückgekoppelten“ Fehlerfortpflanzung ergibt sich ein im allgemeinen oszillatorisches „Ausbrechen“ des Entfaltungsergebnisses  $S(N)$  in dramatisch große, absolut unsinnige Werte!

Insgesamt bestehen acht Möglichkeiten bei der Handhabung der Entfaltung zur Bestimmung der DIR und damit der gesuchten Signalfunktion  $S(N)$  in praktischen Fällen: Die Meßkurven sind jeweils geglättet oder nicht. Zusätzlich: Die experimentell bestimmte DIR ist nachträglich geglättet oder nicht.

Die Resultate scheinen am brauchbarsten zu sein, wenn jeweils die verwendete Funktion vorher geglättet wurde. Zur Demonstration zeigt Abb. 4 das Resultat der Entfaltung, wenn die DIR aus der verrauschten Funktion in Abb. 3c) bei Kenntnis des Rechteck-Testpulses gewonnen wurde und diese dann mit dieser DIR wiederum entfaltet wurde, so daß der Rechteckimpuls des Testsignals wieder als Resultat erwartet wird. Das Ergebnis erscheint qualitativ und quantitativ befriedigend, wenn man berücksichtigt, daß auch hier eine nachgeschaltete Glättung die „Überschwinger“ in den Flanken beseitigen würde.

Diese „Überschwinger“ in der Nähe der steilen Flanken entsprechen dem bekannten „Gibbs'schen Phänomen“ der „Kontrastüberhöhung“. Dieses und weitere Details zur Rauschfrage im Zusammenhang mit „Entfaltung“ zu diskutieren, muß weiteren Ausführungen an anderer Stelle vorbehalten bleiben.

## VI. Zusammenfassung

Bei vielen zeitdynamischen Experimenten besteht das Problem der Isolierung der wahren Signalfunktion aus der durch die Responsefunktion der Meßanordnung durch Faltung „verfremdeten“ Meßwertabfolge als Funktion der Zeit.

Es wird eine für die numerische Meßwertanalyse brauchbare Methode der „Entfaltung“ angegeben. Dieser Algorithmus stellt die direkte Umkehrung der numerischen Faltung dar und ist damit exakt. Er ist darüber hinaus auch prinzipiell „schneller“ als rekursive Approximationsverfahren. Der Algorithmus ist programmiertechnisch einfach und auch auf Kleincomputern zu realisieren.

Die zur Entfaltung notwendige Kenntnis der Deltaimpuls-Responsefunktion kann, so sie nicht primär modelltheoretisch als bekannt vorausgesetzt wird, ebenfalls mit Hilfe der Entfaltungsprozedur experimentell gewonnen werden. Dazu genügt die Applikation eines beliebig geformten Testimpulses, z.B. eines Rechteckpulses endlicher Dauer, anstelle der Signalgröße.

Die „Entfaltung“ besitzt als prinzipiell „differentielle“ mathematische Rechenoperation grundsätzlich eine relativ ungünstige Fehlerfortpflanzung. Entfaltungsbeispiele zeigen jedoch, daß mathematisch vorgegebene Testfunktionen in der Regel wechselseitig mit nur ca.  $\frac{1}{1000}$  relativer Standardabweichung numerisch reproduziert werden.

Die Diskussion überlagerter, weil im Experiment unvermeidlicher Rauscheinflüsse in der Meßwertfunktion bzw. in der verwendeten Deltaimpuls-Responsefunktion zeigt jedoch die Notwendigkeit auf, gegebenenfalls sämtliche Einzelfunktionen vor der Entfaltung Modell-frei zu glätten, z.B. mittels approximativer Splinefunktionen. Damit sind in der Praxis befriedigende Resultate zu erzielen.

## Literaturverzeichnis

- [1] W.J. Smothers and Y. Chiang, Differential Thermal Analysis, Chem. Publ. Co, New York, 1958.
- [2] Karl Klotter, Technische Schwingungslehre, Springer-Verlag, Berlin, 1981; Nachdruck der 3. Auflage; 1. Band: Einfache Schwinger, Teil A: Lineare Schwingungen.
- [3] Klaus Niederdrenk, Die endliche Fourier- und Walsh-Transformation mit einer Einführung in die Bildverarbeitung, Vieweg-Verlag, Braunschweig / Wiesbaden; 2. Auflage, 1984, herausgegeben von Gisela Engeln-Müllges.
- [4] Erwin Meyer und Dieter Guicking, Schwingungslehre, Vieweg-Verlag, Braunschweig, 1974.
- [5] Michael Möser, Analyse und Synthese akustischer Spektren, Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [6] Wolfgang Hemminger und Günther Höhne, Grundlagen der Kalorimetrie, Chemie-Verlag, Weinheim und New York, 1979.
- [7] Karl-Richard Löblich, Differenzthermoanalyse, Hannover, 1984; (VB 376/84; Kaliforschungs-Institut der Kali und Salz AG).
- [8] Christian H. Reinsch, Smoothing by Spline Functions, Numerische Mathematik, Vol. 10 (1967), 177–183.